

## APLICACION DEL METODO DE POWELL DE CUADRADOS MINIMOS NO LINEALES A CURVAS DE CRECIMIENTO

M.M. VILLADA

Observatorio Astronómico de Córdoba

### I. INTRODUCCION

Como es bien sabido, la determinación de la abundancia de elementos químicos en las atmósferas estelares se lleva a cabo clásicamente mediante el análisis de perfiles de líneas o de sus anchos equivalentes. Los métodos comúnmente usados son dos: el primero utiliza la llamada curva de crecimiento, mediante la relación entre el ancho equivalente y el número de átomos capaces de absorber esa línea; el segundo emplea modelos de atmósferas estelares y consiste en calcular los perfiles de varias líneas espectrales dentro de un modelo dado cuyos parámetros, temperatura efectiva, gravedad superficial y composición química, se hacen variar hasta lograr el mejor acuerdo con las observaciones. Este método es laborioso en virtud de que el perfil de una línea depende también del mecanismo de absorción de la misma. Esto hace que se deba calcular un perfil con varios modelos distintos. La ventaja de este procedimiento es que el perfil de la línea es sensible a efectos que la curva de crecimiento no muestra, tales como rotación, macroturbulencia, pérdida de masa, etc... Además, las asimetrías en el perfil de la línea pueden indicar otras propiedades de las atmósferas.

El método de la curva de crecimiento utiliza un gran número de datos observacionales, como son los anchos equivalentes de las líneas puras del espectro. Se trata, sin embargo, de un método estadístico que presenta ciertas ventajas y desventajas. El gran número de anchos equivalentes medidos tiende a reducir los errores observacionales, pero las diferencias reales entre las distintas líneas se pierden en el proceso de promediarlas. Además, cuando se construye una única curva de crecimiento para una atmósfera estelar, se supone que todas las líneas se originan en la misma capa de la atmósfera con una determinada temperatura efectiva y presión electrónica. Evidentemente, esto constituye una aproximación al problema. Sin embargo, los resultados que se obtienen de la aplicación de ambos métodos son perfectamente comparables, no pudiendo asignarse a uno primacía sobre el otro.

El ancho equivalente  $W_\lambda$  de una línea espectral es una función  $W_\lambda = f(f_{jk} N_i, T, \delta_{jk}, \lambda)$ , donde  $\lambda$  es la longitud de onda de la línea considerada,  $f_{jk}$  la fuerza de oscilador correspondiente,  $\delta_{jk}$  la constante de amortiguamiento radiativo,  $T$  la temperatura y  $N_i$  el número de átomos capaces de absorber esa línea. Puede fácilmente demostrarse que si se escribe el cociente  $W_\lambda/\lambda$ , la expresión resultante es

independiente de  $\lambda$ . Además, es conveniente expresar:

$$\log \frac{W_\lambda c}{\lambda v} = g(\log \tau_0), \text{ siendo } \tau_0 = \frac{\sqrt{1} e^2}{m_e c} \frac{f_{ik}}{\Delta v_D} N_i,$$

donde  $c$  es la velocidad de la luz,  $v$  la velocidad cuadrática media de agitación, " $e$ " es la carga del electrón,  $m_e$  la masa del mismo y  $\Delta v_D$  el ancho Doppler. La función  $g(\log \tau_0)$  depende del modelo que se elija para la atmósfera de la estrella, o sea la zona en la que se produce el espectro que se observa. Se muestra que, cualitativamente, la relación que vincula esas cantidades es la que se presenta en la Figura 1.

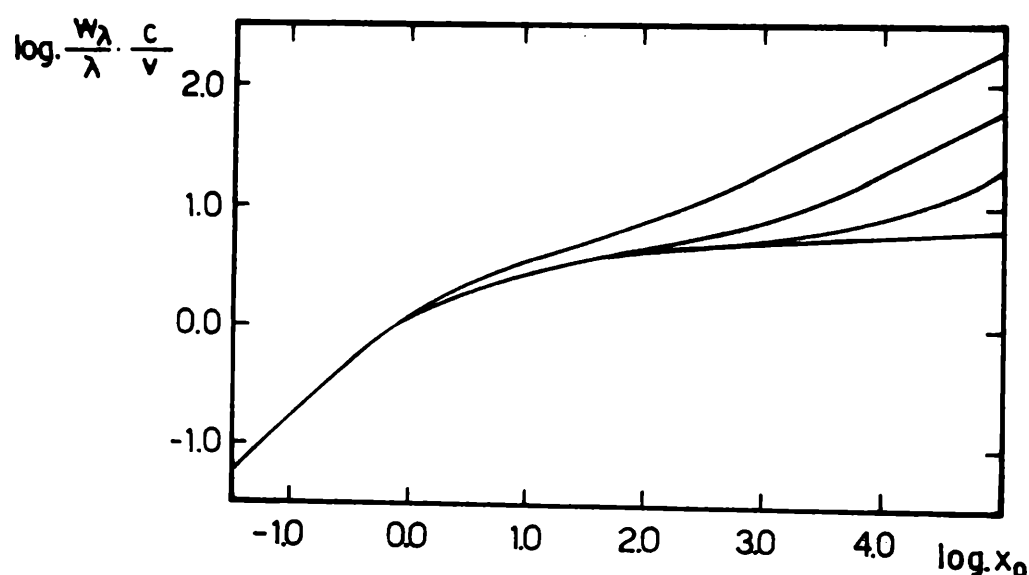


Figura 1

Las curvas de crecimiento teóricas esquematizadas en la Figura 1 tienen aproximadamente la misma forma, cualquiera sea el modelo de atmósfera utilizado. Están caracterizadas por la primera rama ascendente (rama Doppler), en la cual  $W_\lambda/\lambda$  es proporcional a  $N_i f_{ik}$ ; la rama horizontal, en la cual  $W_\lambda/\lambda$  es aproximadamente constante, y la rama de amortiguamiento, en la cual  $W_\lambda/\lambda$  es proporcional a  $(N_i f_{ik})^{1/2}$ .

## II. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

El problema que se plantea y se intenta resolver en el presente trabajo es el siguiente. Dada una distribución de puntos observados en un diagrama  $\log (W_\lambda/\lambda)$  versus  $\log x_0$ , con

$$\log x_0 = \log \lambda_{j1} g_{j1} f_{j1} + \frac{5040}{T} (\chi_i - \chi_j)$$

siendo  $\chi_i$  y  $\chi_j$  los potenciales de excitación correspondientes. Se intentará ajustar de la mejor manera posible una curva de crecimiento teórica a dicha distribución. Si bien este ajuste es realizado usualmente en forma visual, dicho procedimiento lleva implícito una inevitable componente de subjetividad. Precisamente, para eliminar cualquier

tipo de ecuación personal, se ha desarrollado un método matemático basado en el tratamiento de datos por cuadrados mínimos no lineales, que se describe a continuación.

### III. DESCRIPCION DEL METODO

Teniendo en cuenta las actuales facilidades con que cuenta el Departamento de Computación del Observatorio Astronómico de Córdoba, el método aludido ha sido desarrollado para la OLIVETTI P 6060 de dicho departamento.

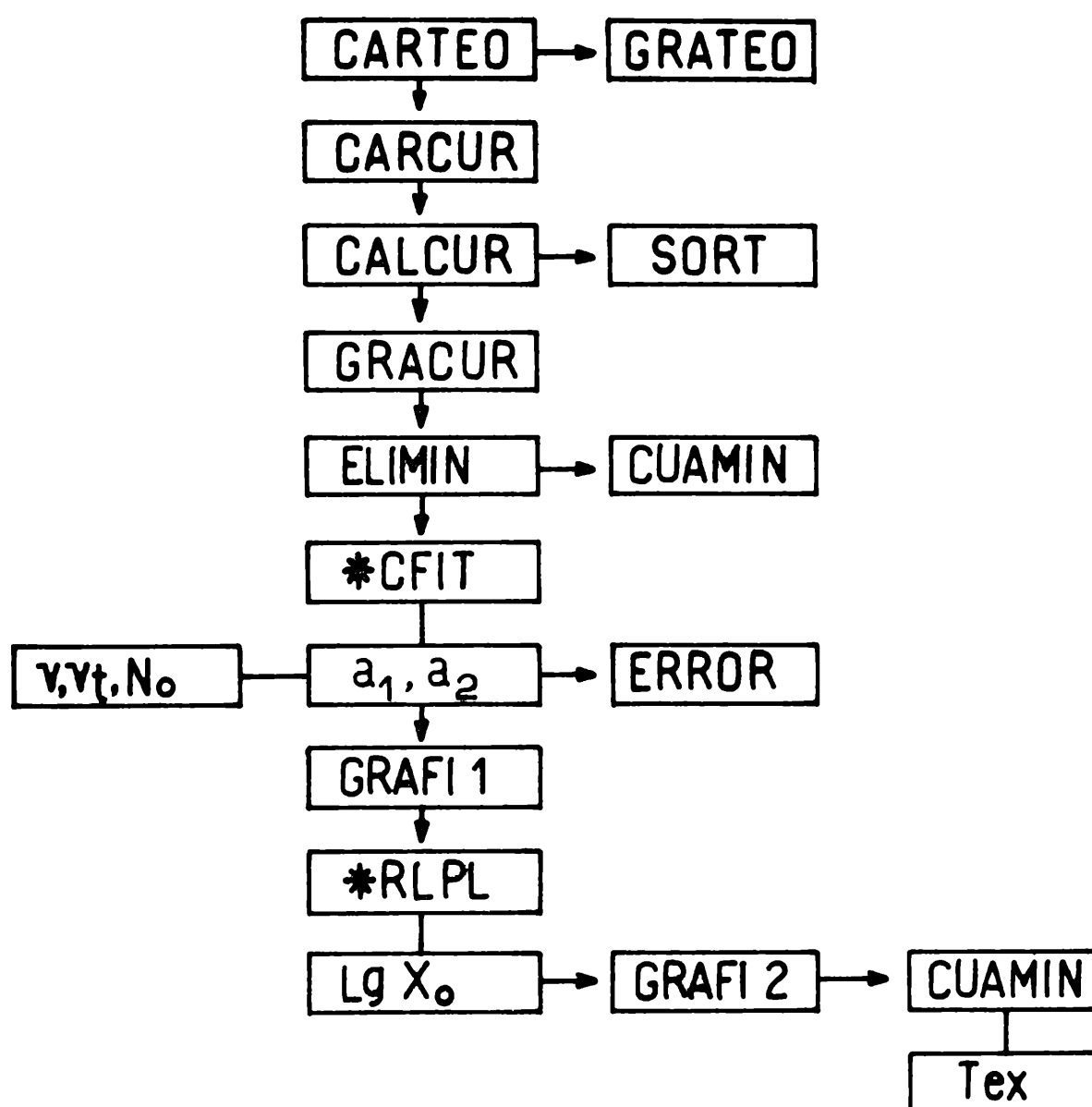


Figura 2

El diagrama de flujo, esquematizado en la Figura 2, resume las diferentes etapas que incluye el método. El primer programa, denominado CARTEO, permite archivar las curvas de crecimiento teóricas con las que se compararán los datos observacionales. Dicho programa, sin embargo, archiva puntos (abscisas y ordenadas) y no curvas.

El segundo programa, denominado GRATEO, ha sido elaborado de manera de ajustar estos puntos mediante un polinomio de 6° grado permitiendo, además, su representación gráfica.

El programa CARCUR carga los datos observacionales ( $\lambda$  y  $W_\lambda$ ), en tanto que CALCUR elabora los mismos de manera de obtener las abscisas y ordenadas de la curva de crecimiento empírica. El programa SORT ordena los datos según abscisas crecientes y GRACUR grafica esta curva empírica.

Los puntos que definen la rama Doppler de la curva de crecimiento empírica, presentan en general una apreciable dispersión, debida a las impresiones involucradas en la medición de anchos equivalentes y/o determinación de las fuerzas de oscilador. Se hace necesaria entonces, la eliminación de puntos que puedan viciar el análisis numérico. El programa ELIMIN resuelve este problema al permitir eliminar los puntos que quedan fuera de una franja cuya pendiente coincide con aquella de la primera rama de la curva teórica y su ancho está determinado por la media de las desviaciones. Esta condición puede diferir, en general, según el criterio del usuario. El proceso de eliminación anterior incluye el empleo de CUAMIN, programa de cuadrados mínimos lineales.

El paso siguiente emplea el programa \*CFIT, el cual ajusta una función escalar arbitraria a un conjunto de datos, mediante cuadrados mínimos no lineales. En este caso, la función dada es un polinomio de 6° grado. Básicamente, el problema consiste en resolver un sistema de ecuaciones en derivadas parciales igualadas a cero y de forma tal que el hessiano evaluado en esas soluciones sea positivo. Dado que en la práctica resolver ese sistema de ecuaciones no lineales no es una tarea trivial, se recurre a métodos numéricos que consisten en elegir un valor inicial y luego efectuar iteraciones de acuerdo al siguiente esquema:  $x^{p+1} = x^p + h^p D^p$ , donde  $x^p$  es una aproximación al mínimo en la iteración  $p$ ,  $D^p$  un vector dirección y  $h^p$  un escalar positivo. La iteración se continúa hasta que se satisface algún criterio de convergencia. En este caso se ha elegido el método de Gradientes Conjugados de Powell, descrito por Goldfeld y Quandt (1972), que resuelve una secuencia de minimizaciones unidimensionales. Cada iteración consiste en minimizar la función en  $n$  direcciones conjugadas y al final de cada una de esas iteraciones, se conserva ese conjunto de direcciones o se elige otro nuevo. Si  $X = (x_i, y_i)$  con  $i = 1 \dots N$ , es un conjunto de datos y se desea ajustarlos a un modelo  $f(a_1, \dots, a_k)$  por mínimos cuadrados, se tendrá que minimizar la siguiente función

$$F = \sum_{i=1}^N \left[ y_i - f(a_1, \dots, a_k, x_i) \right]^2$$

Consideremos para simplificar una iteración y supongamos que se han completado  $k$  iteraciones. Sean entonces  $d_r^k$ , con  $r = 1, \dots, n$ , "n"

direcciones linealmente independientes originadas en la última estimación del mínimo óptimo,  $x^k = (x_1^k, \dots, x_n^k)$ . Para  $r = 1, \dots, n$ , se debe calcular secuencialmente  $\lambda_r$  para minimizar la función  $F(x^k + \sum_{j=1}^r \lambda_j d_j^k)$ . El desplazamiento  $\delta = \sum_{j=1}^n \lambda_j d_j^k$  se utiliza como la dirección buscada y se elige un valor de  $\lambda$  que minimice la función  $F(x^k + \lambda \delta)$ , en la cual

$$x^{k+1} = \sum_{j=1}^n \lambda_j d_j^k + x^k.$$

El punto de partida para la siguiente iteración será  $x^{k+1} = x^k + \lambda \delta$ . El nuevo conjunto de direcciones de coordenadas será ahora:

$$\begin{cases} d_i^{k+1} = d_{i+1}^k & ; \quad i = 1, \dots, n-1 \\ d_n^{k+1} = \end{cases}$$

En resumen, inicialmente las direcciones coinciden con las de los ejes de coordenadas. Dichas direcciones varían sucesivamente como indica el último paso.

En lo que concierne a la minimización, el esquema es el que sigue:

a) la función  $F$  se evalúa en tres puntos sobre una dirección de coordenadas; b) se ajusta una forma cuadrática a estos tres puntos y se calcula un cuarto por la fórmula interpolatoria de Lagrange; c) se impone la condición de mínimo a este cuarto punto y d) uno de los tres puntos iniciales se reemplaza por este mínimo y el proceso se repite hasta que se alcanza el error mínimo establecido por el criterio de convergencia elegido.

Obtenemos de esta manera los valores  $a_1$  y  $a_2$  que corresponden al corrimiento en abscisas y ordenadas que mejor superponen una curva de crecimiento teórica a valores observados.

El procedimiento continúa con la aplicación del programa ERROR. Este programa permite obtener la desviación cuadrática media de los datos respecto de la curva teórica considerada y el número de puntos que quedan afuera de una cierta franja determinada por la media de las desviaciones. A partir de los valores  $a_1$  y  $a_2$ , se derivan la velocidad cuadrática media  $v$ , la velocidad de turbulencia  $v_t$  y  $N_j$ .

GRAF1 grafica la curva de crecimiento teórica superpuesta al conjunto de datos observados. El programa \* RLPL permite obtener las abscisas teóricas  $\log X_0$ , empleando el método Newton-Raphson de aproximaciones sucesivas. Luego, con los valores teóricos y los potenciales de excitación, utilizando los programas GRAFI2 y CUAMIN, obtenemos la temperatura de excitación,  $T_{ex}$ .

Para probar la bondad de este procedimiento se consideró el caso particular del Sol. Se emplearon los anchos equivalentes publicados por Moore, Minnaert y Houtgast (1966); las fuerzas de oscilador obtenidas por Kurucz y Peytremann (1975), y las curvas de crecimiento teóricas del modelo de Schuster-Schwarzschild.

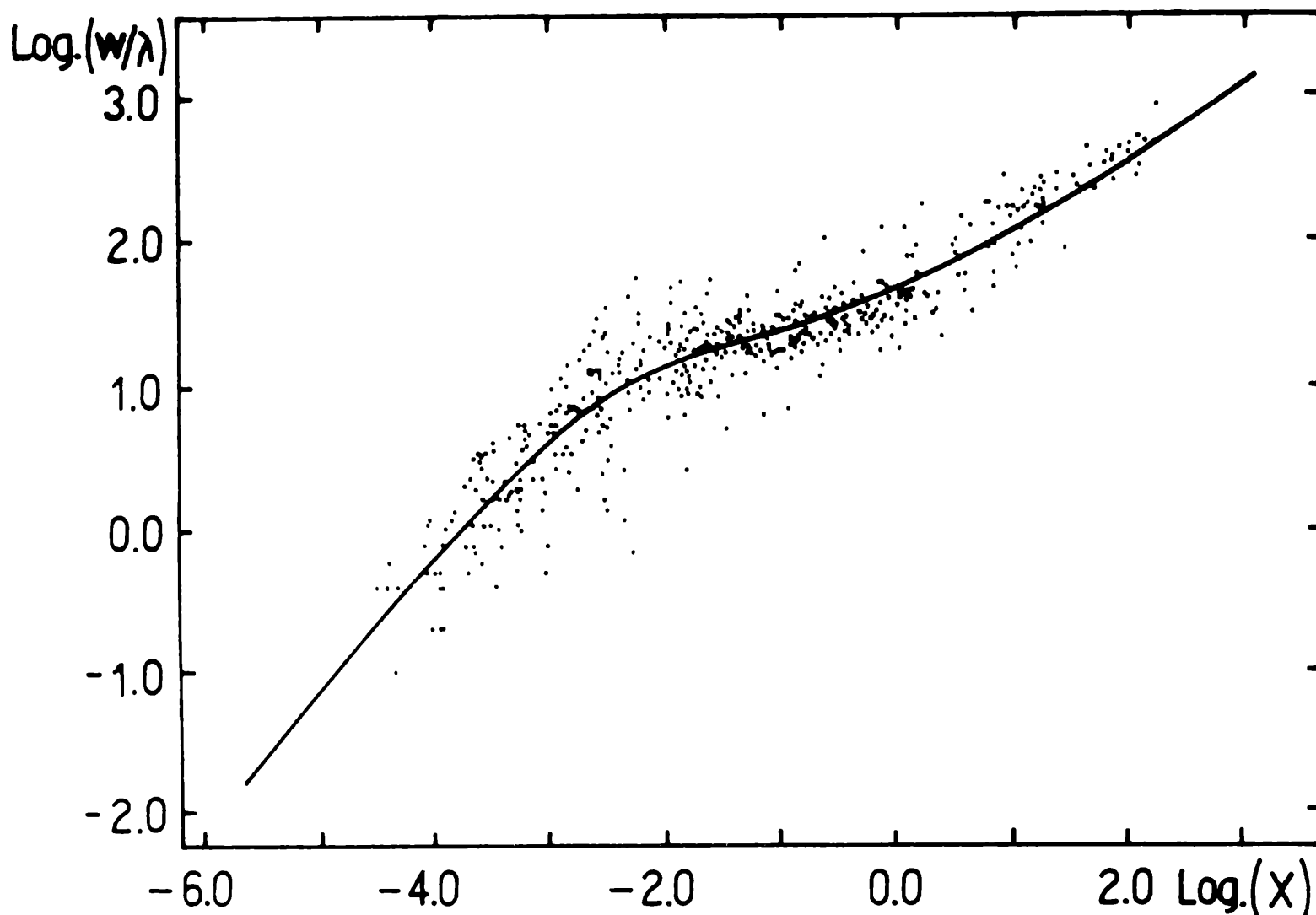


Figura 3: Curvas: empírica (522 datos) y teórica N° 3

En la Figura 3 se aprecia el ajuste resultante una vez excluidos los puntos que presentan elevada dispersión. En la Figura 4 se muestra el ajuste obtenido cuando se emplean todos los valores. Es de notar que el ajuste de la curva teórica a los datos observacionales dados mejorará en la medida que el modelo elegido represente adecuadamente la atmósfera de la estrella.

Finalmente, en la Figura 5 se muestran los resultados obtenidos en este caso y aquéllos derivados de aplicar idéntico procedimiento al caso de curvas teóricas de Milne - Eddington.

#### REFERENCIAS

- Goldfeld, S.M.; Quandt, R.E., (1972), "Non Linear Methods in Econometrics". Contributions to Economical Analysis. North Holland Publishing Co.
- Moore, Ch.; Minnaert, M.G.J.; Houtgast, J., (1966), "The Solar Spectrum 2935 Å to 8770 Å", Second Revision of Rowland's Preliminary Table of Solar Spectrum Wavelengths. National Bureau of Standards Monograph 61.
- Kurucz, R.L.; Peytremann, E., (1975), "A Table of Semiempirical gf Values", Smithsonian Astrophysical Observatories.

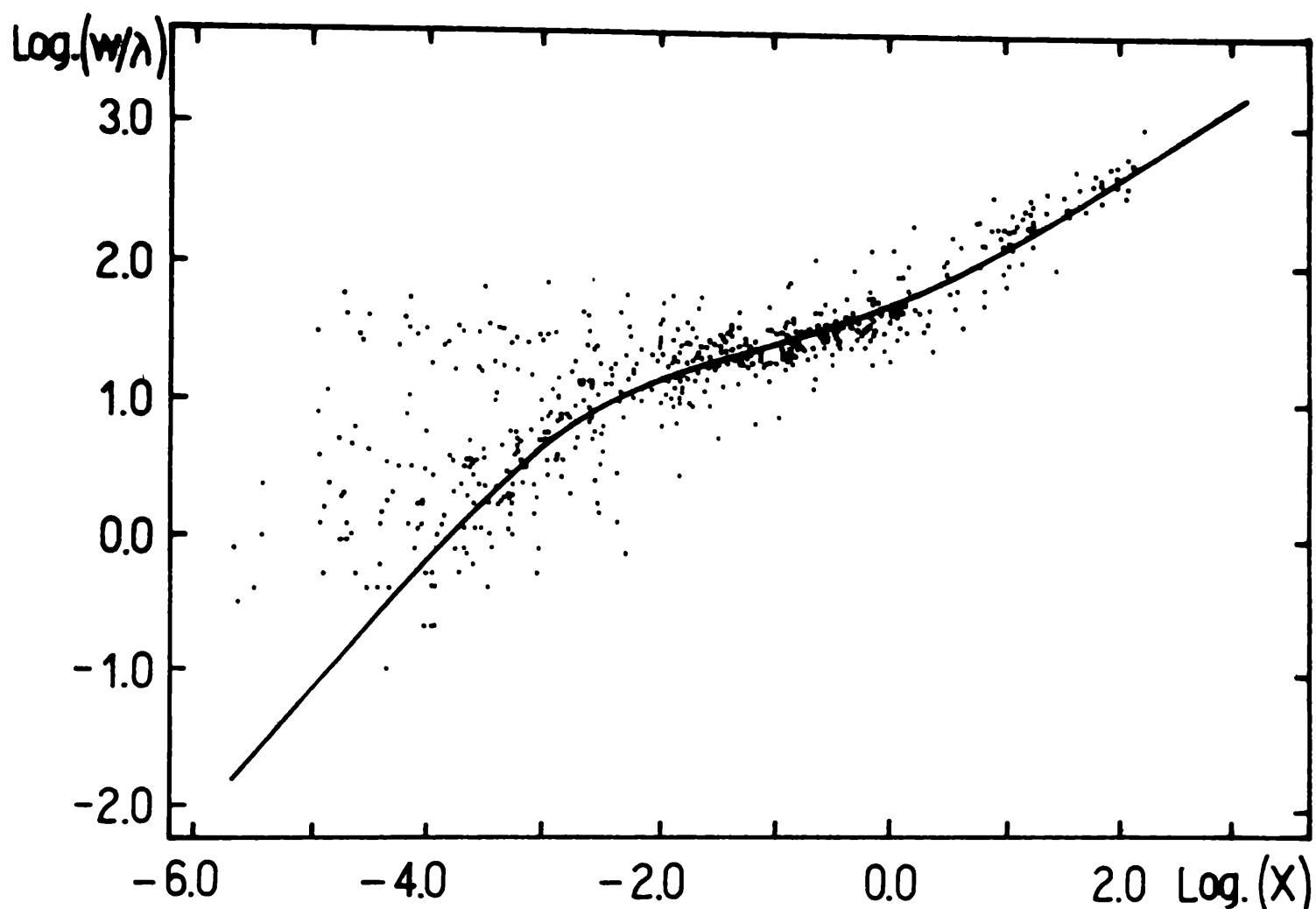


Figura 4: Empírica (607 datos) y teórica N° 3

| Modelo            | S-S                   |      |      | M-E                   |      |      |
|-------------------|-----------------------|------|------|-----------------------|------|------|
| $(\alpha, \beta)$ | (-10.8; -5.18)        |      |      | (-11.1; -5.25)        |      |      |
|                   | No                    | v    | vt   | No                    | v    | vt   |
|                   | $2472 \times 10^{19}$ | 1892 | 1377 | $2807 \times 10^{19}$ | 1686 | 1077 |

Figura 5

Agradecimientos:

Deseo agradecer en forma especial a la Dra. Elsa G. de Rodríguez Pardina su orientación y apoyo en la parte computacional de este trabajo, así también como al Dr. J.J. Clariá por sus consejos, que mejoraron la presentación del mismo.